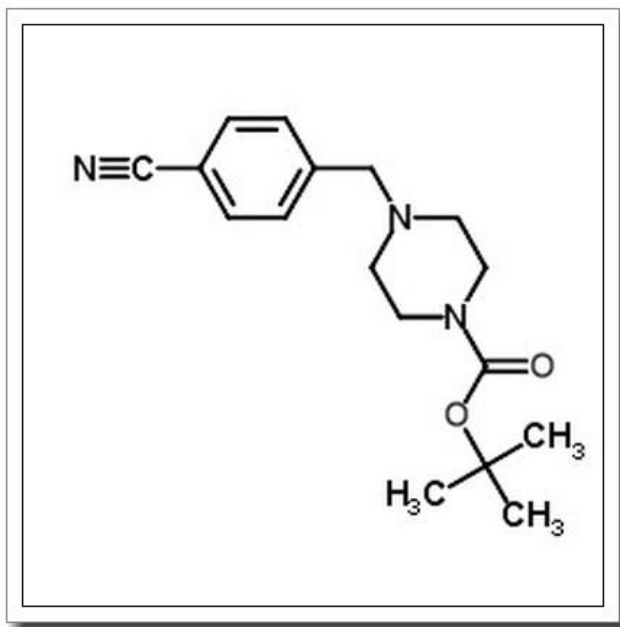


1-Boc-4-(4-氰基苄基)哌嗪

tert-butyl 4-[(4-cyanophenyl)methyl]piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-[(4-cyanophenyl)methyl]piperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-4-(4-氰基苄基)哌嗪
CAS 号	849237-14-5
分子式	C ₁₇ H ₂₃ N ₃ O ₂
分子量	301.383
纯度	>96%

产品说明

1-Boc-4-(4-氰基苄基)哌嗪产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl 4-[(4-cyanophenyl)methyl]piperazine-1-carboxylate, 中文名 1-Boc-4-(4-氰基苄基)哌嗪, CAS 号 849237-14-5。其分子式为 C₁₇H₂₃N₃O₂, 分子量 301.383, 是一种白色至类白色结晶粉末, 纯度>96%。该化合物属于哌嗪类衍生物, 具有 Boc 保护基和氰基苄基结构, 在有机合成中表现出良好的稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类化合物的关键中间体, 1-Boc-4-(4-氰基苄基)哌嗪在药物化学领域具有重要价值。其 Boc 保护基可选择性脱除, 进一步修饰哌嗪环的氮原子, 而氰基苄基结构则为引入芳香环或转化为其他官能团(如羧酸、酰胺)提供了便利。该分子常用于构建具有生物活性的靶向化合物, 尤其在神经递质调节剂和抗肿瘤药物的研发中应用广泛。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体合成, 具体包括以下领域:

- 1) 抗抑郁药和抗精神病药物的结构修饰;
- 2) 蛋白激酶抑制剂的设计与合成;
- 3) 作为金属配体用于催化反应;
- 4) 荧光标记探针的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C 下避光干燥保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥惰性气氛(如氮气或氩气)下操作, 避免接触强氧化剂或强酸。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 微溶于醇类, 不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%, MS 和 NMR 验证结构准确。安全数据表明, 其急性毒

性较低（LD50 未明确），但仍需佩戴防护手套和护目镜操作。MSDS 显示其对眼睛和皮肤有轻微刺激性，意外接触时需用大量清水冲洗。废弃物处理应遵循当地化学品管理法规。

注：本说明仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需进一步验证其安全性和有效性。